

Modellierungskonzepte zur laser-induzierten Ablation für den MICROLAS-Antrieb

Stefan Scharring, Johannes M.F. Peter, Daniel J. Förster,
Hans-Albert Eckel

Institut für Technische Physik, DLR Stuttgart

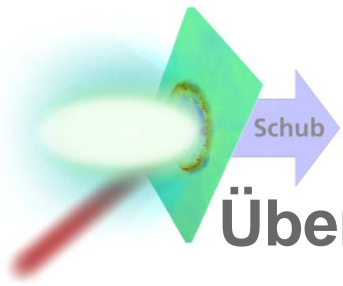
Workshop Mikroantriebe

17.04.2013



Wissen für Morgen





Übersicht

- Zielsetzung
- Grundlagen
- VLL online: Hydrodynamisches Modell
- PICLas-Code: Direkte Monte-Carlo-Simulationen (DSMC)
- IMD-Code: Molekulardynamik (MD)
- Zusammenfassung



- mehrjährige Betriebsdauer

Modelle – Parameter, Messgrößen, Anforderungen

Laserpuls:

- $\lambda, \tau, I(t, r)$
- Einfallswinkel ϑ
- Raytracing

Ablationsjet:

- Jet-Divergenz
- Z, T_e, T_i, n_e
- Geschwindigkeitsverteilung, I_{sp}
- Manipulierbarkeit (magnetische Linse)
- Verdünnte Plasmaströmungen
- Kein Gleichgewicht
- Rekombination
- 3D-Laser-Plasma-WW



Target:

- Verschiedene Metalle
- Ablationsschema, f_{rep}
- Kraterprofil und Auswurf
- Oberfläche (Folgepuls)
- 3D-Laser-Materie-WW
- Kurzzeitdynamik

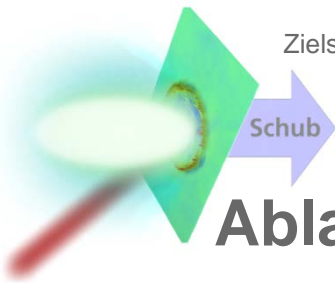


Schub $\vec{F}, \Delta\vec{F}$:

- Axiale Impulskomponenten
- Laterale Impulskomponenten
- Kurzzeitdynamik

- geringer Treibstoffverbrauch

- präziser Schub 0,1 ... 100 μN (1 mN)

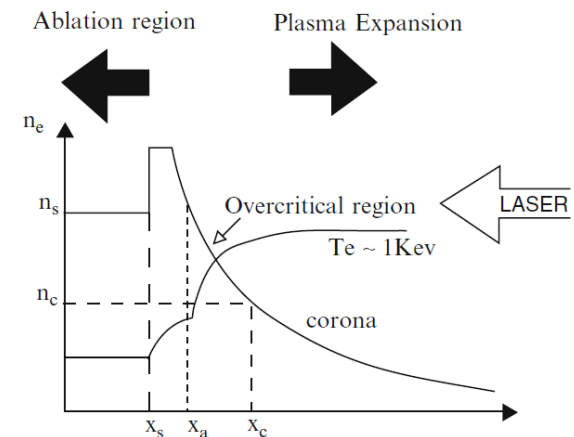


Ablation bei kurzen Laserpulsen (ns-Regime)

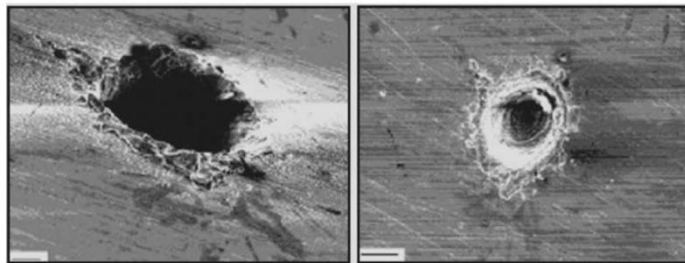
- Expansion des Plasmajets *während* des Laserpulses
- → Entstehung einer Stoßwelle im Material

$$C_m \leftarrow P(\text{Mbar}) = 12.3 \left(\frac{I(W/cm^2)}{10^{14}} \right)^{2/3} \left(\frac{1}{\lambda(\mu m)} \right)^{2/3} \left(\frac{A}{2Z} \right)^{1/3}$$

$$I_{sp} \leftarrow \dot{m}(kg/s/cm^2) = 150 \left(\frac{I(W/cm^2)}{10^{14}} \right)^{1/3} \left(\frac{1}{\lambda(\mu m)} \right)^{4/3} \left(\frac{A}{2Z} \right)^{2/3}$$

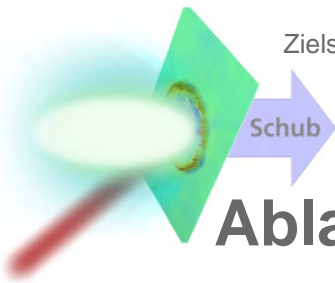


- → Bildung von Explosionskratern (punktförmige Energiequelle)



$$R_{crat} \propto (E_{abs})^{1/3}$$

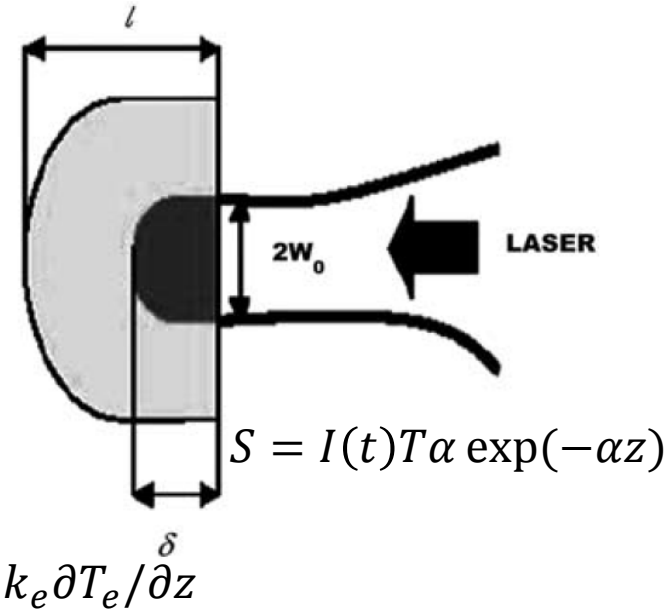
Figure 16. SEM images showing the surface morphology of craters created on Al flat targets: (left) diameter $D = 30 \mu m$, flux $\approx 2,200 J/cm^2$; (right) $D = 100 \mu m$, flux $\approx 4,000 J/cm^2$.



Ablation bei ultrakurzen Laserpulsen (fs-Regime)

- Energieabsorption durch freie Elektronen (skin depth δ)
- Wärmeleitung und -diffusion in die nähere Umgebung (Schichtdicke l)
- Wechselwirkung mit Gitter, 2-T-Modell:

$$\begin{cases} C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = -\frac{\partial Q(z)}{\partial z} - \gamma(T_e - T_i) + S \\ C_i \frac{\partial T_i}{\partial t} = \gamma(T_e - T_i) \end{cases}$$



- → Temperatur im Gleichgewicht:

$$T_{eq} = \frac{F_o}{C_i l^2 - \delta^2} \left[l \exp\left(-\frac{z}{l}\right) - \delta \exp\left(-\frac{z}{\delta}\right) \right]$$

- → Aufbrechen chemischer Bindungen, Ablation, Plasmajet





Virtual Laser Laboratory (VLL - <http://vll.ihed.ras.ru/>)

Step 1: General Conditions

Task name:

Initial moment t_{init} (ps):

Final moment t_{end} (ps):

Number of data files [1, 100]:

No motion regime:



Choose the number of objects:

Choose the number of pulses:

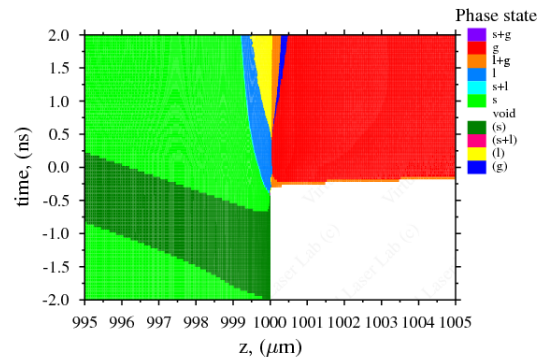
Step 2: Objects

Object 1

Choose material:

Input left surface position (nm):

Input right surface position (nm):



Step 3: Laser Pulses

Pulse 1

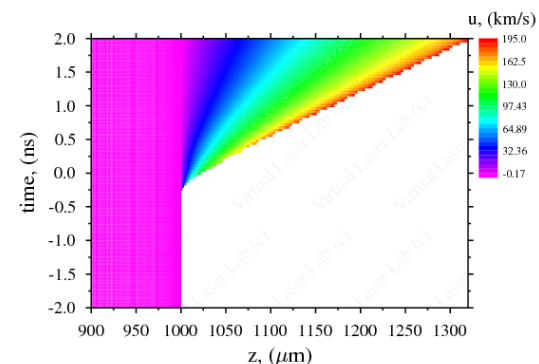
Laser wavelength (mkm), possible range is [0.2, 2]:

Angle of incidence (degrees), possible range is [0, 89]:

Polarization

Travelling direction:

Intensity profile (W/cm^2):



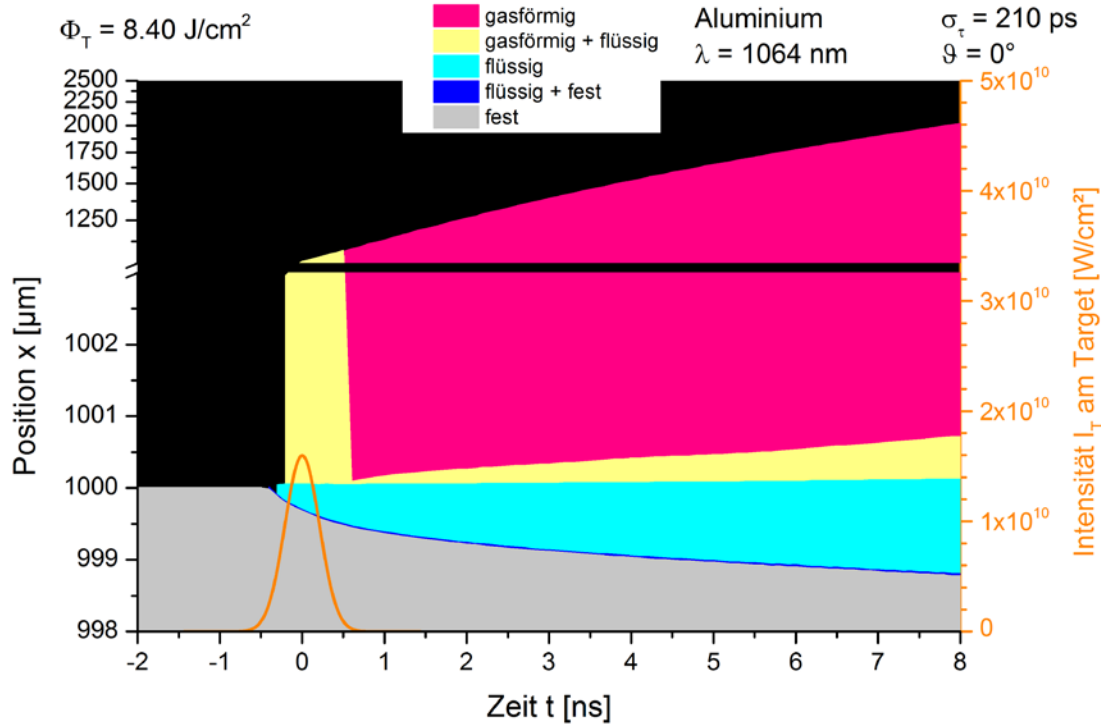
Im Folgenden (Folien 7 – 18):

Post-processing der VLL-Simulationsergebnisse

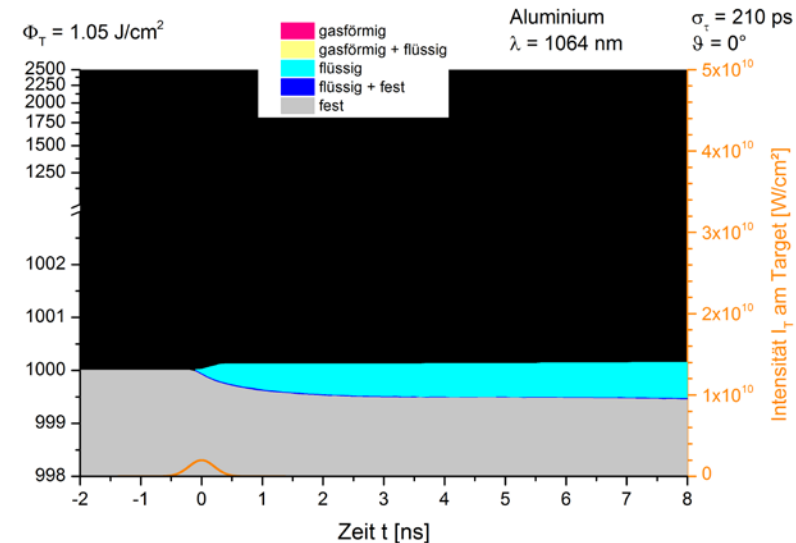
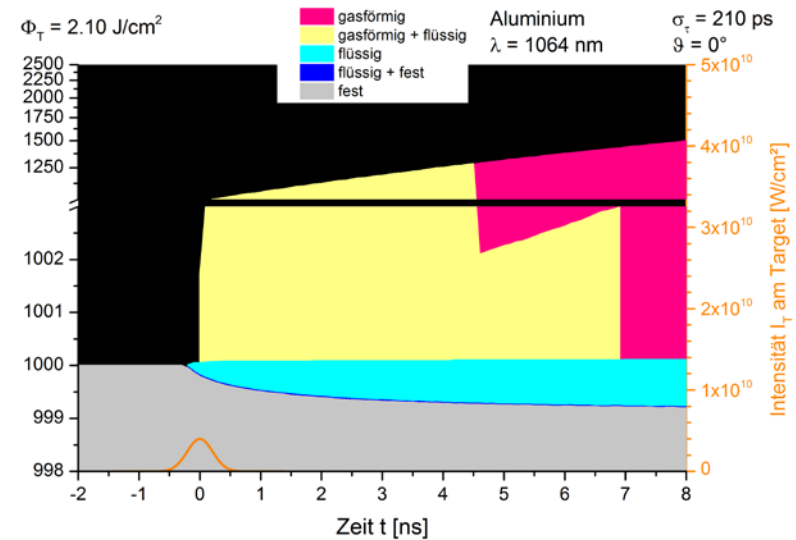


Schub

Phasendiagramme

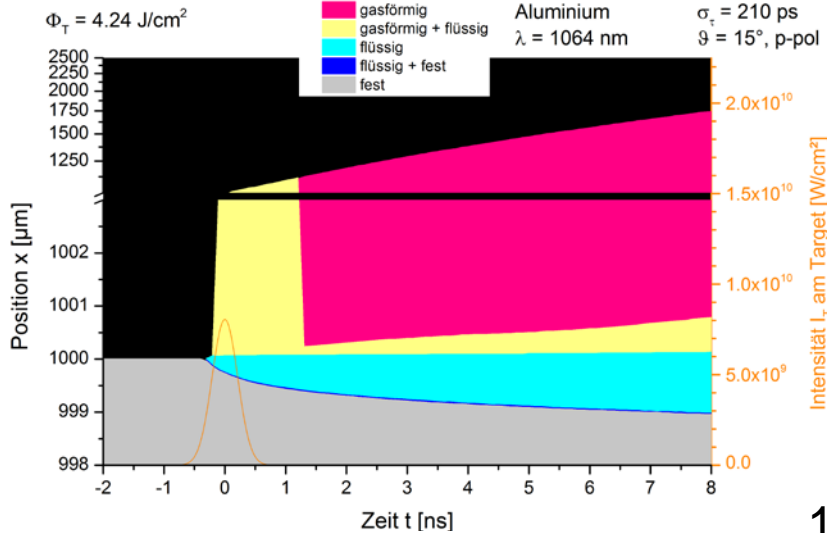
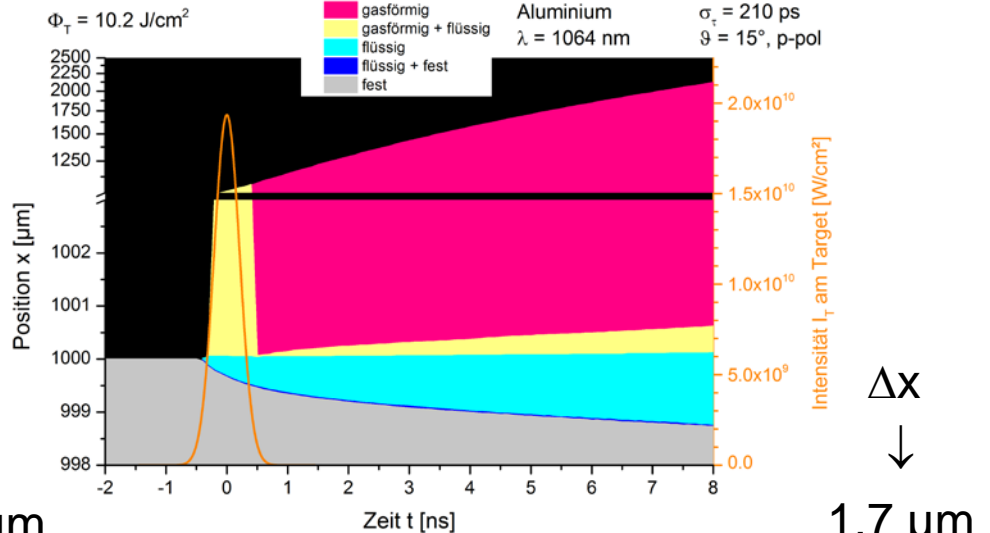
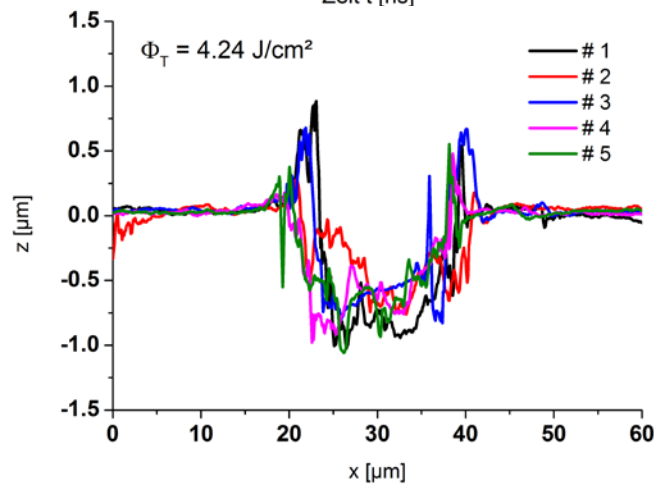
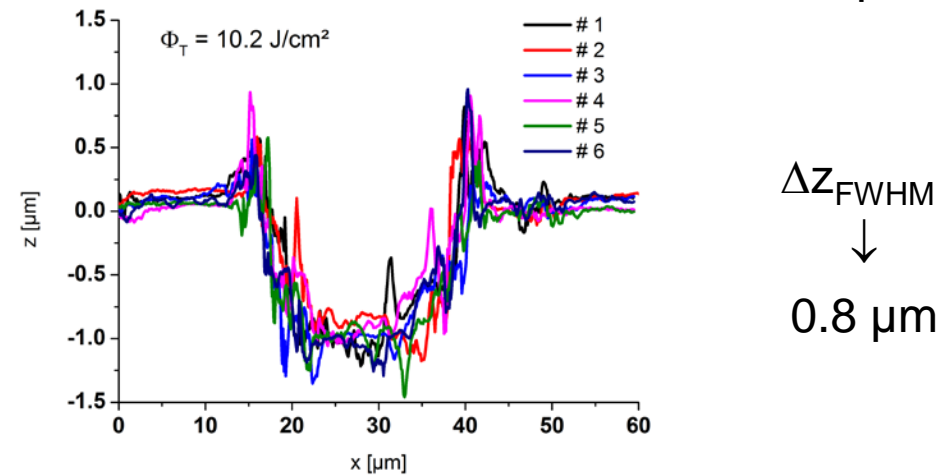


- Treibstrahl: g, g+l
- Target: l, l+s, s



Schub

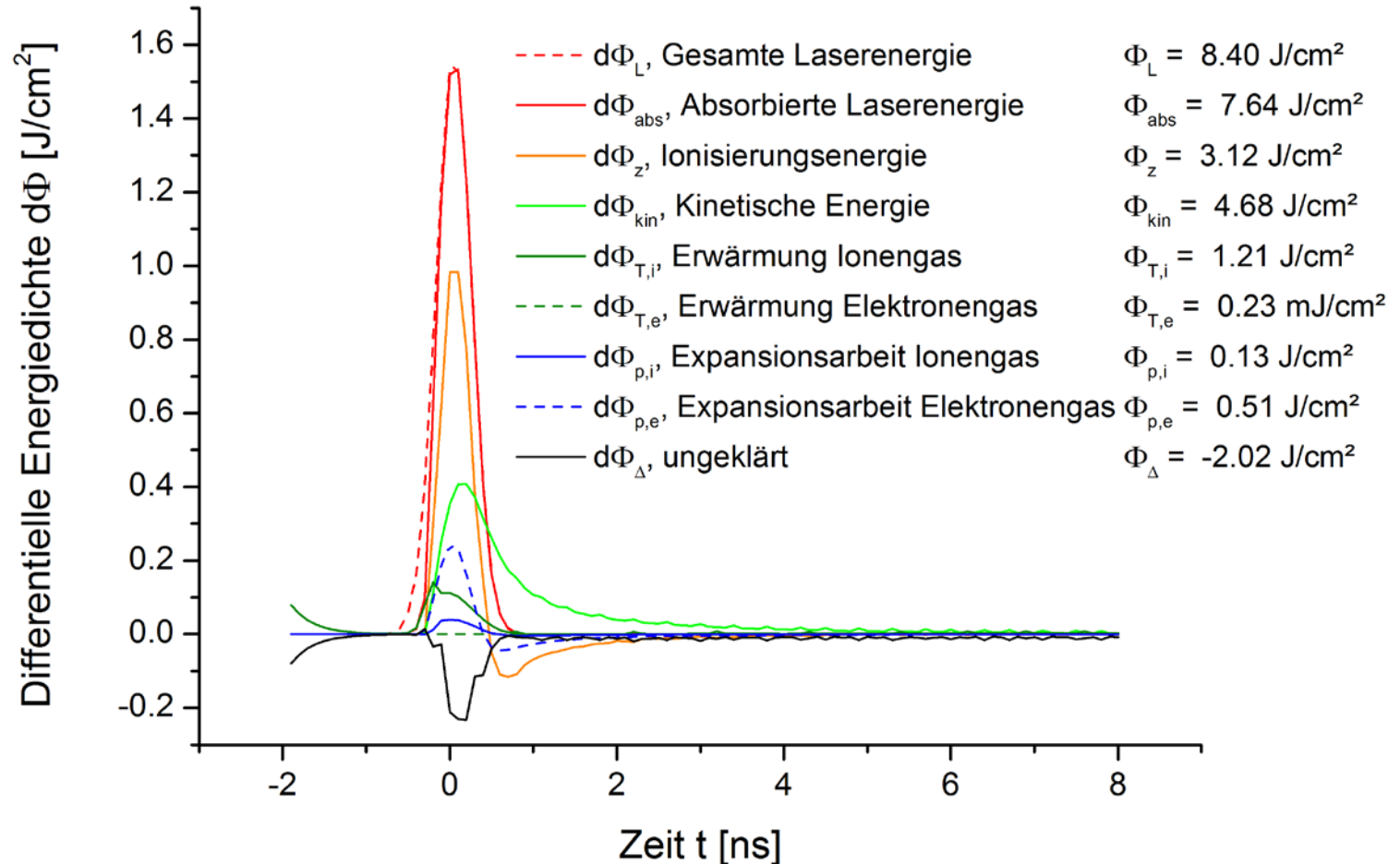
1D-Phasengrenze s/l vs. Ablationskrater

1.2 μm 1.7 μm 

Schub

Differentielle Energiebilanz

Target: Alu , $\lambda = 1064$ nm, s - pol., $\sigma = 210$ ps, $\theta = 0^\circ$, $\Phi_{in} = 8.40$ J/cm²

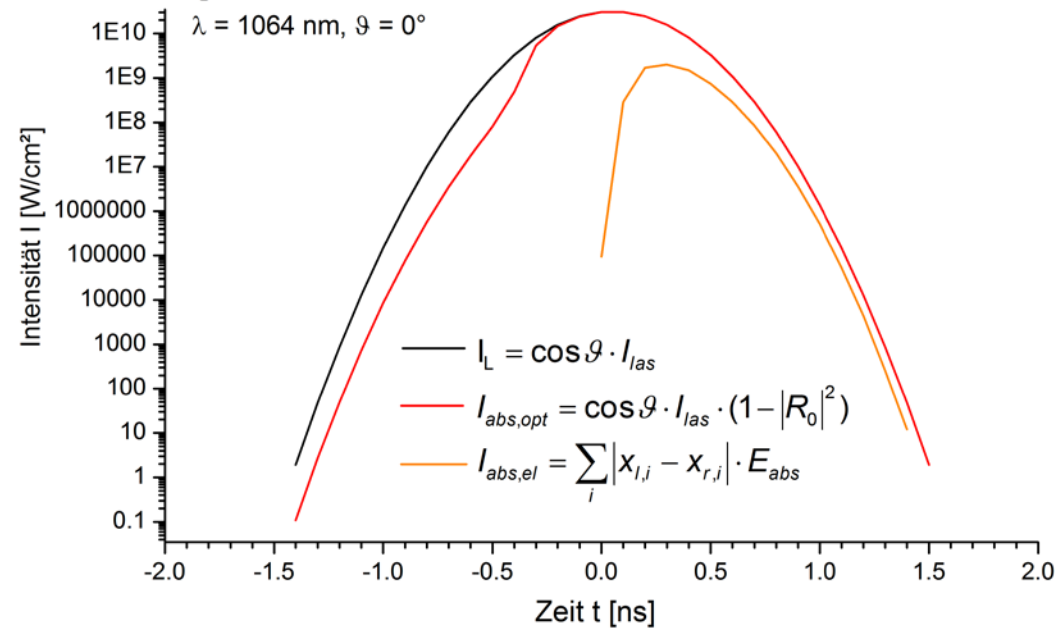
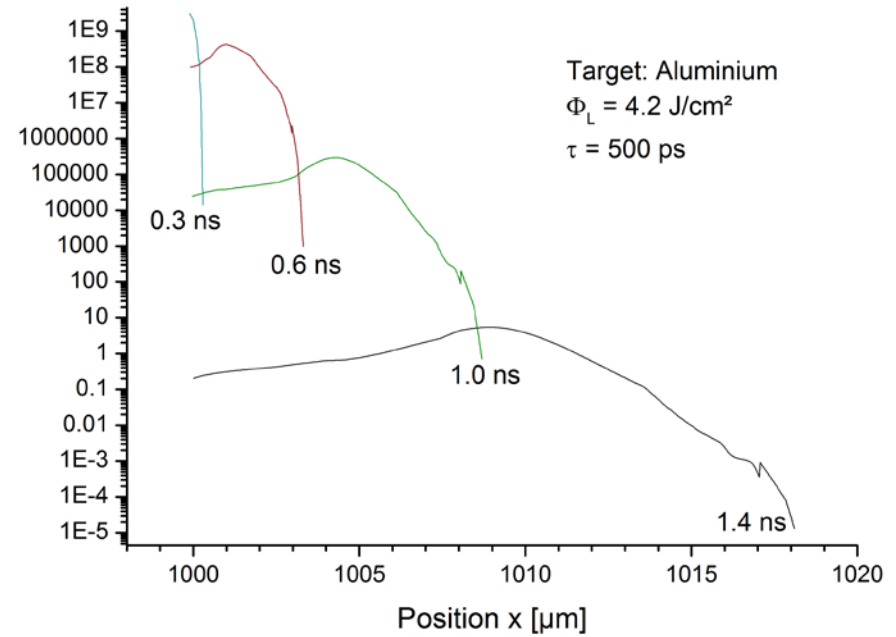


Schub

Plasma-Abschirmung

Target: Aluminium

$$I_L(t) = 3.19235 \cdot 10^{10} \text{ W/cm}^2 \cdot e^{(-1/2(t/210 \text{ ps})^2)}$$

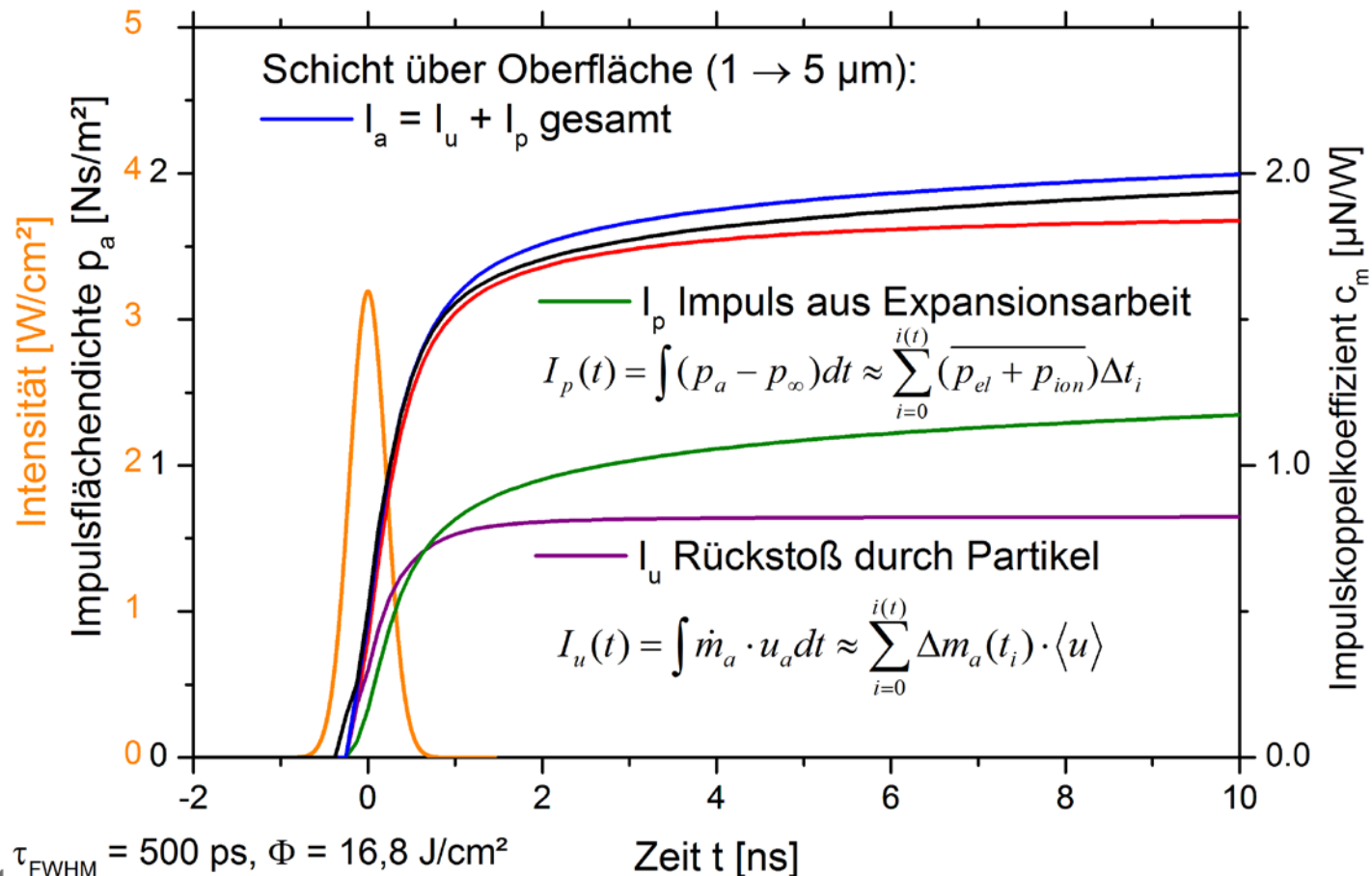
 $\lambda = 1064 \text{ nm}$, $\vartheta = 0^\circ$ Absorbierte Laserleistung I_p [kW/cm^3]

Schub

Schubentstehung

$$p_{ges} = \sum_i m_i v_i \rightarrow I_a \approx \sum_i \rho_i \Delta x_i v_i$$

— Treibstrahl (8 → 1500 μm)
— Target (-1 → 0 mm)

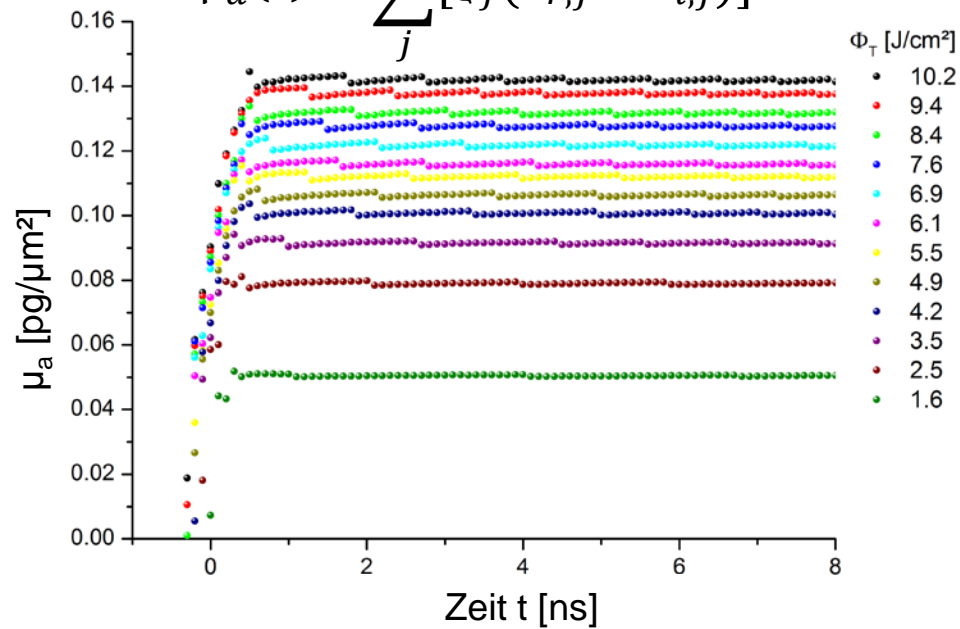


Schub

Entstehung des Ablationsjets

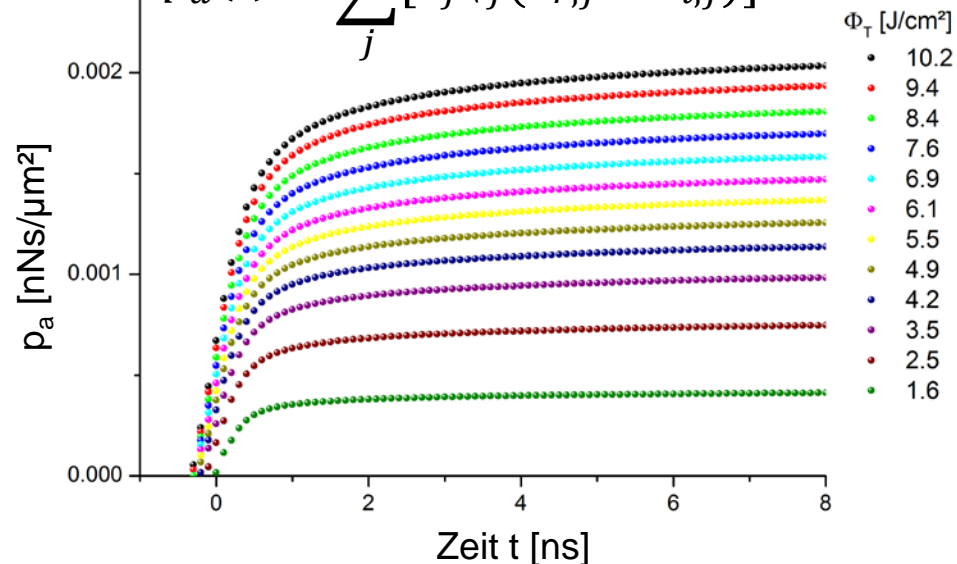
Massenflächendichte μ_a des ablatierten Materials

$$\mu_a(t) = \sum_j [\rho_j (x_{r,j} - x_{l,j})]$$



Impulsflächendichte p_a des Ablationsjets

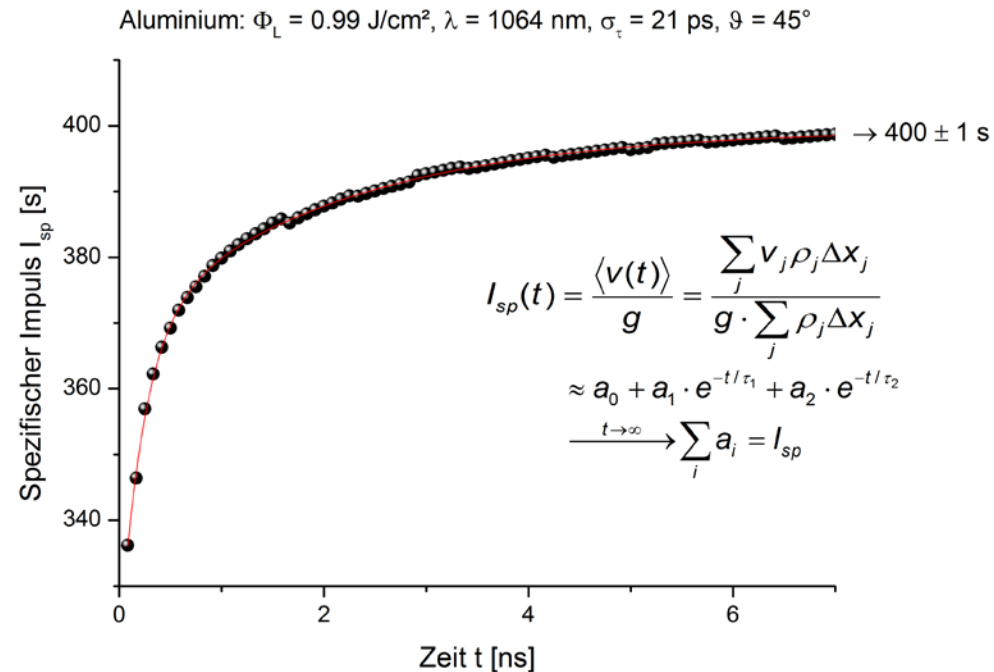
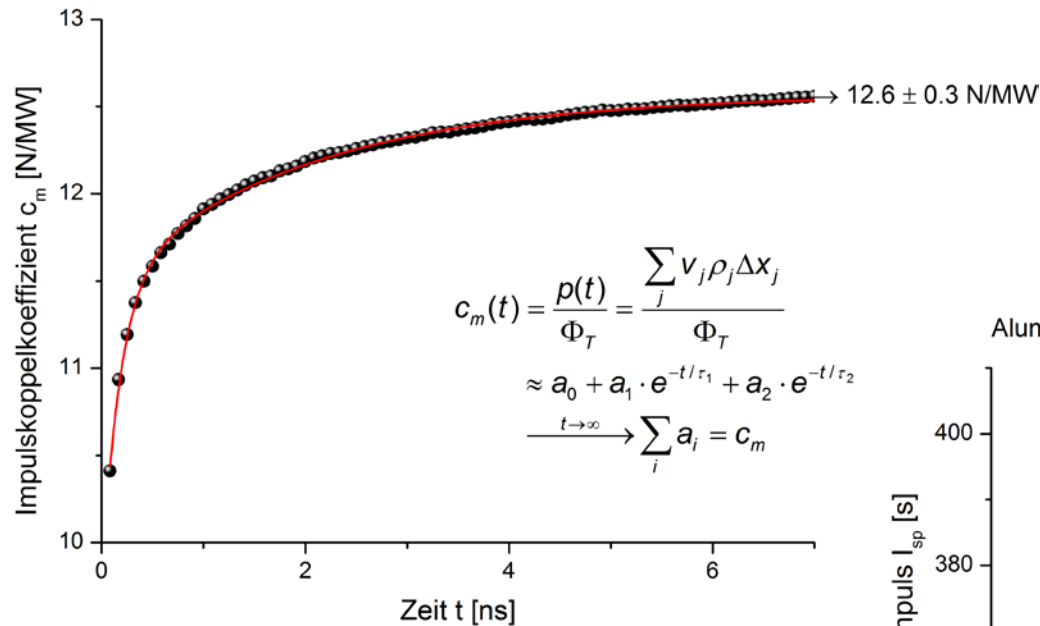
$$p_a(t) = \sum_j [u_j \rho_j (x_{r,j} - x_{l,j})]$$



Schub

Bestimmung der Kenngrößen

Aluminium: $\Phi_L = 0.99 \text{ J/cm}^2$, $\lambda = 1064 \text{ nm}$, $\sigma_t = 21 \text{ ps}$, $\vartheta = 45^\circ$

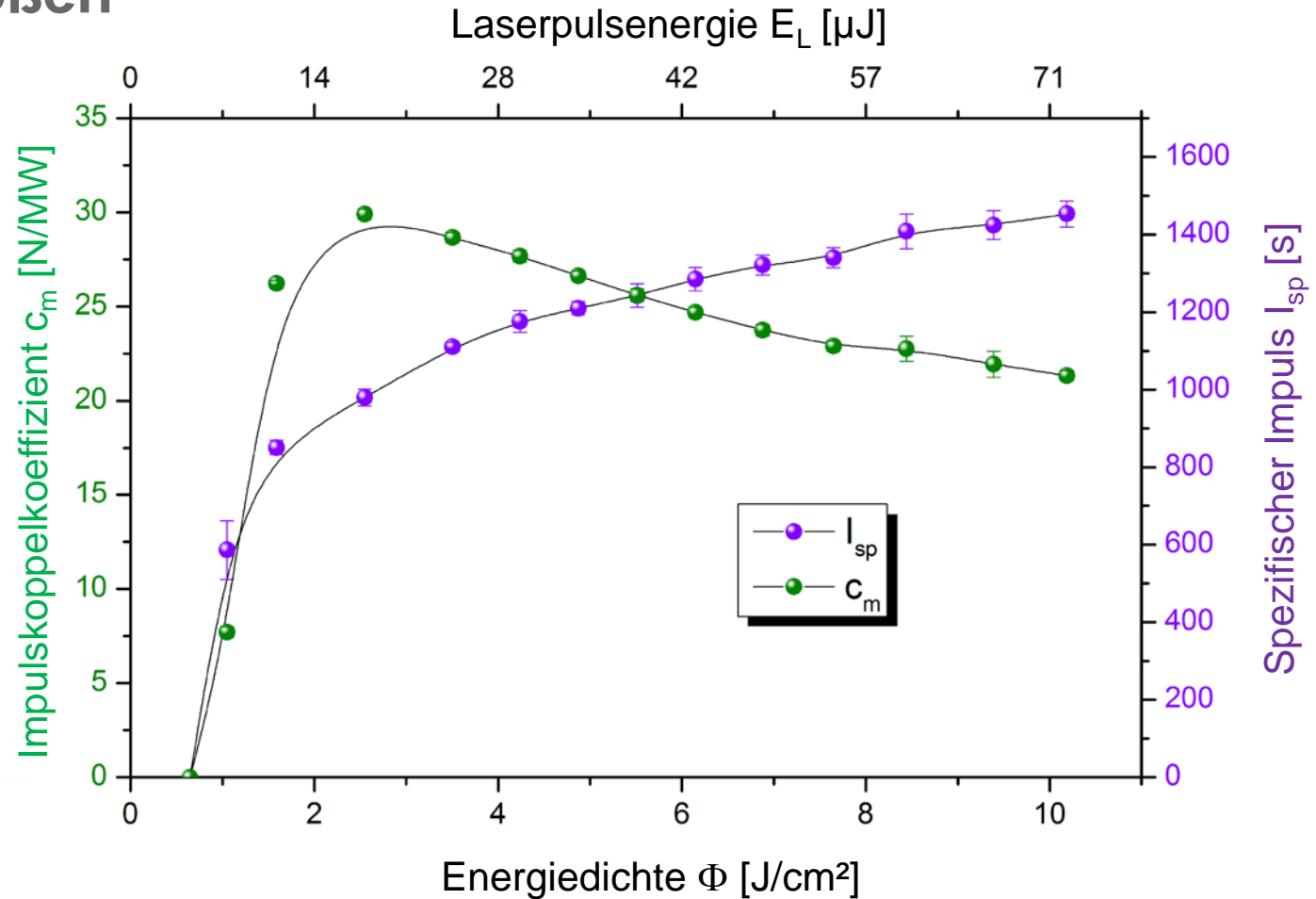


Schub

Kenngrößen

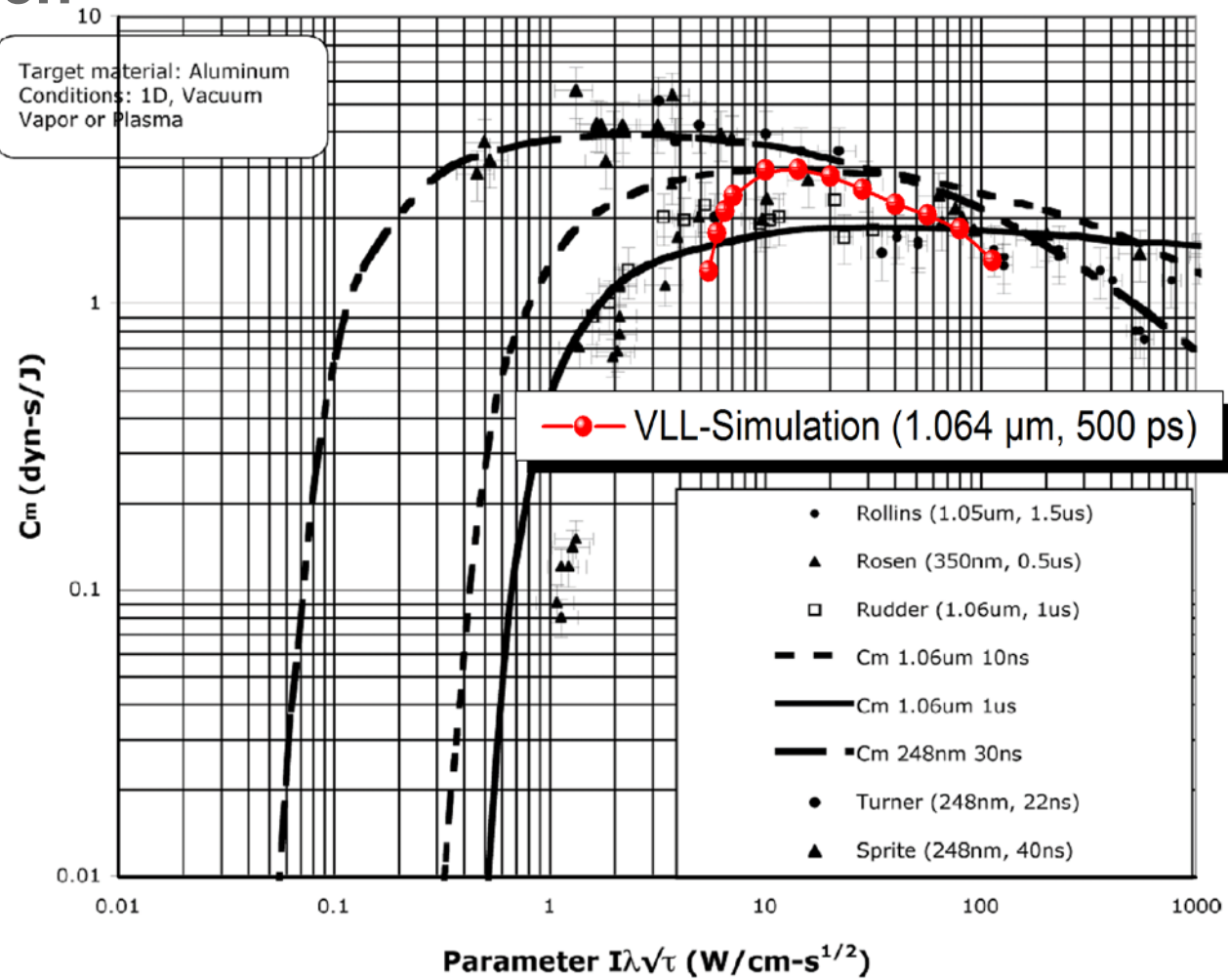


80 mW-Laser (TEEM Photonics)



Schub

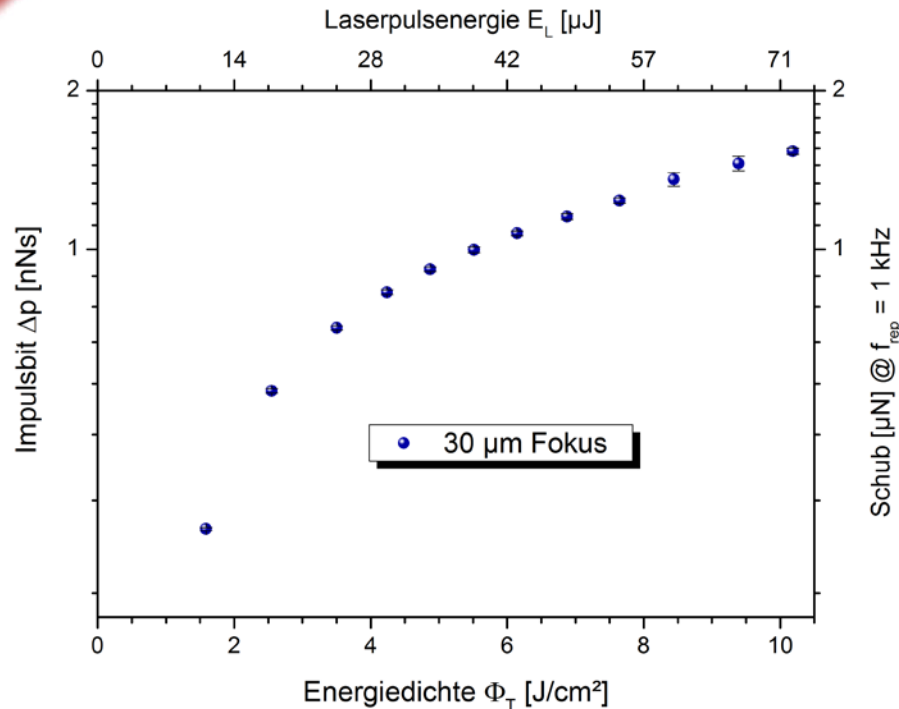
Modellvergleich



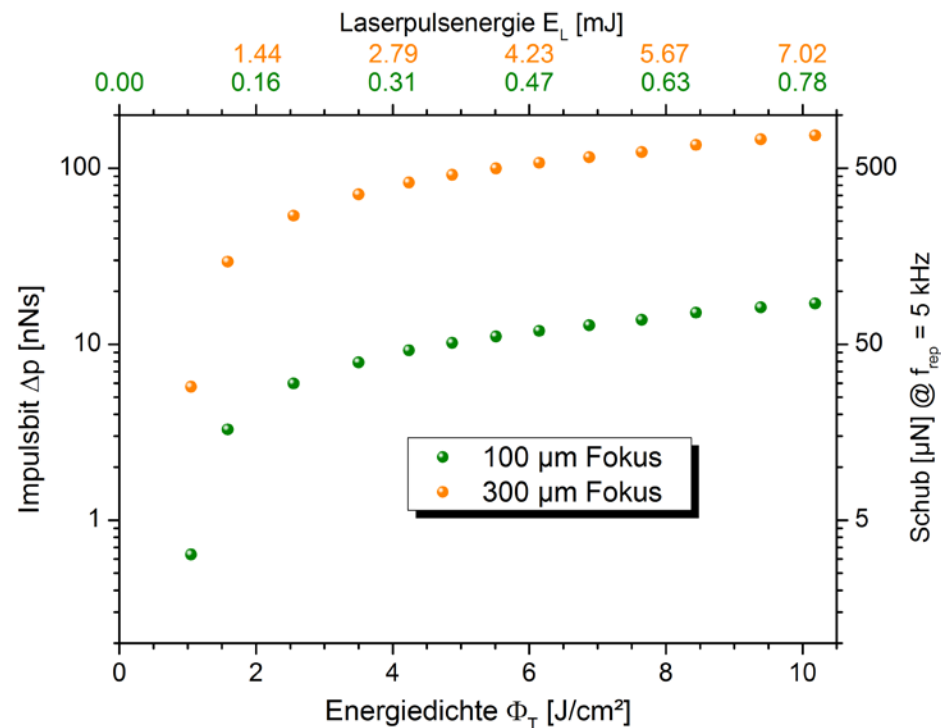
C.Phipps et al., Applying New Laser Interaction Models to the ORION Problem, AIP Conf. Proc. 1278: 492-501 (2010)

Schub

Schubcharakteristik



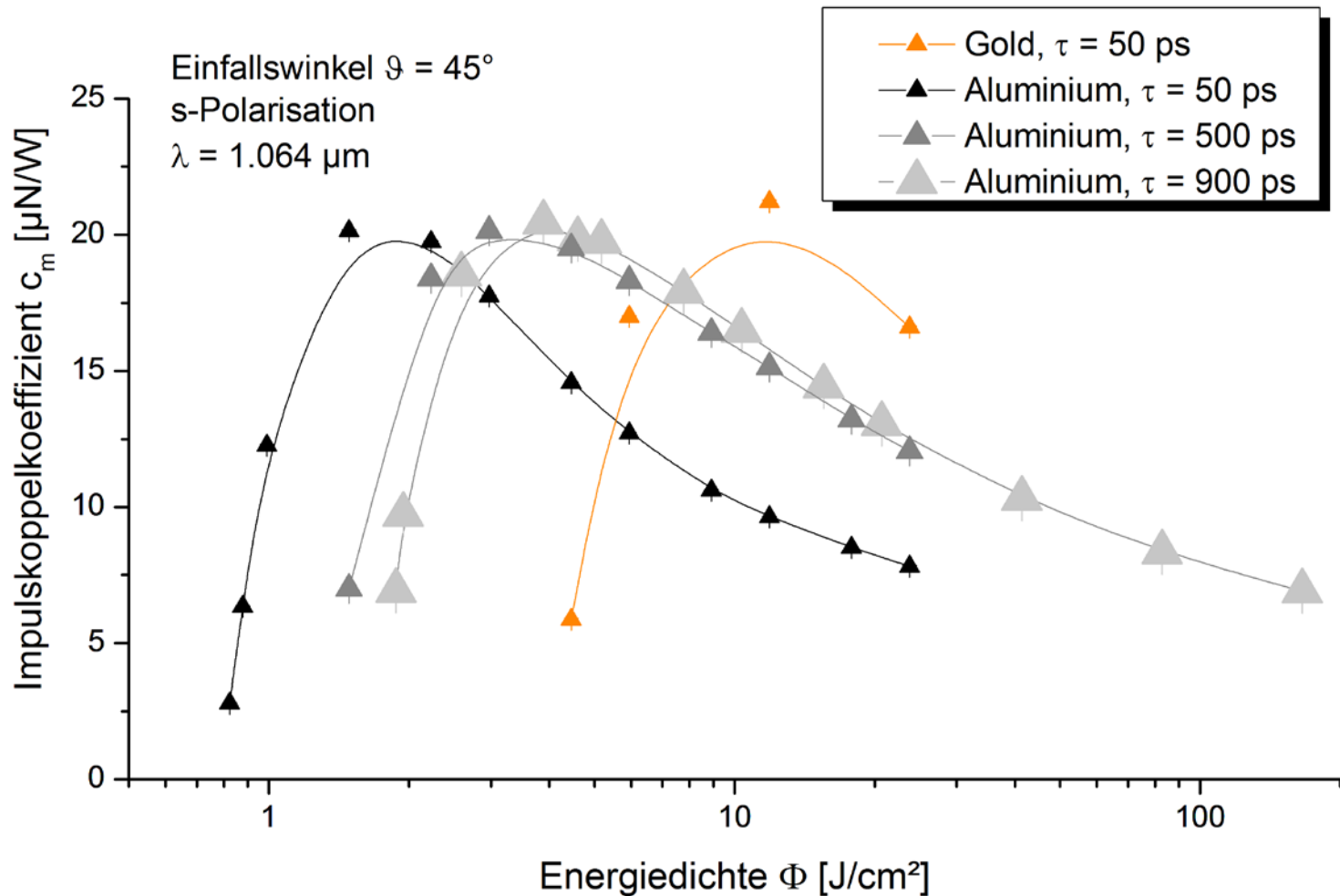
80 mW-Laser (TEEM Photonics)



35 W-Laser (Edgewave)

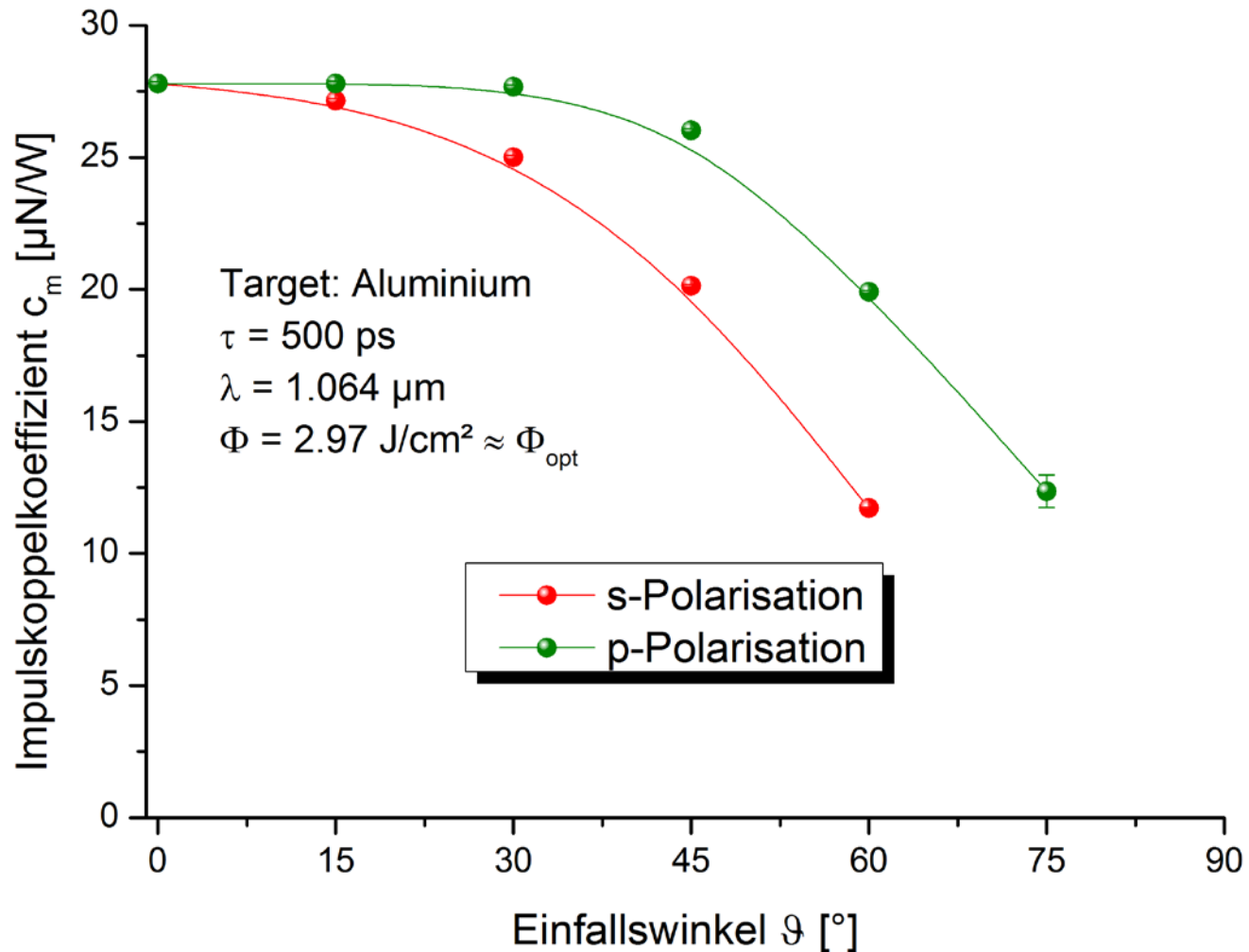
Schub

Parametervariation: Pulsdauer, Material



Schub

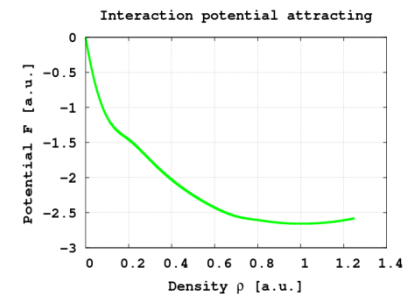
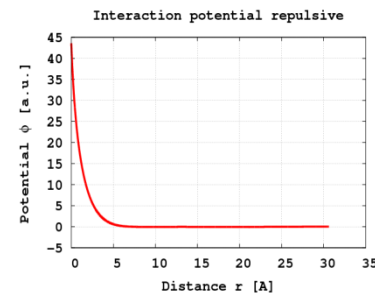
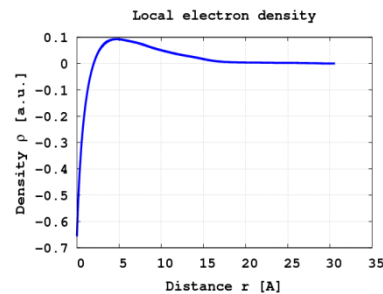
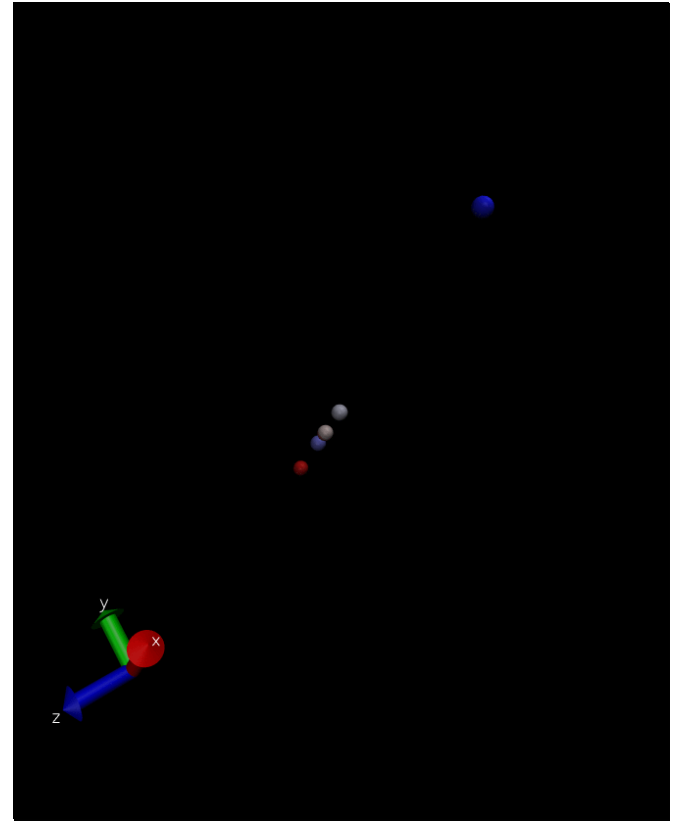
Parametervariation: Einfallswinkel, Polarisation

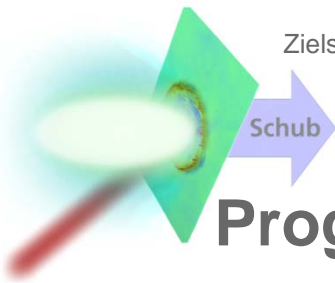


Schub

Molekulardynamik

- Simulation des Ablationsprozesses auf atomarer Ebene in 3 Dimensionen
- Punktteilchen mit definiertem Ort und Geschwindigkeit
- Kräfte: $\vec{F}_i = -\nabla V(r_i)$
- Wechselwirkung über EAM Potentiale V
- Lösung der klassischen Newton'schen Gleichungen





Programmpaket IMD



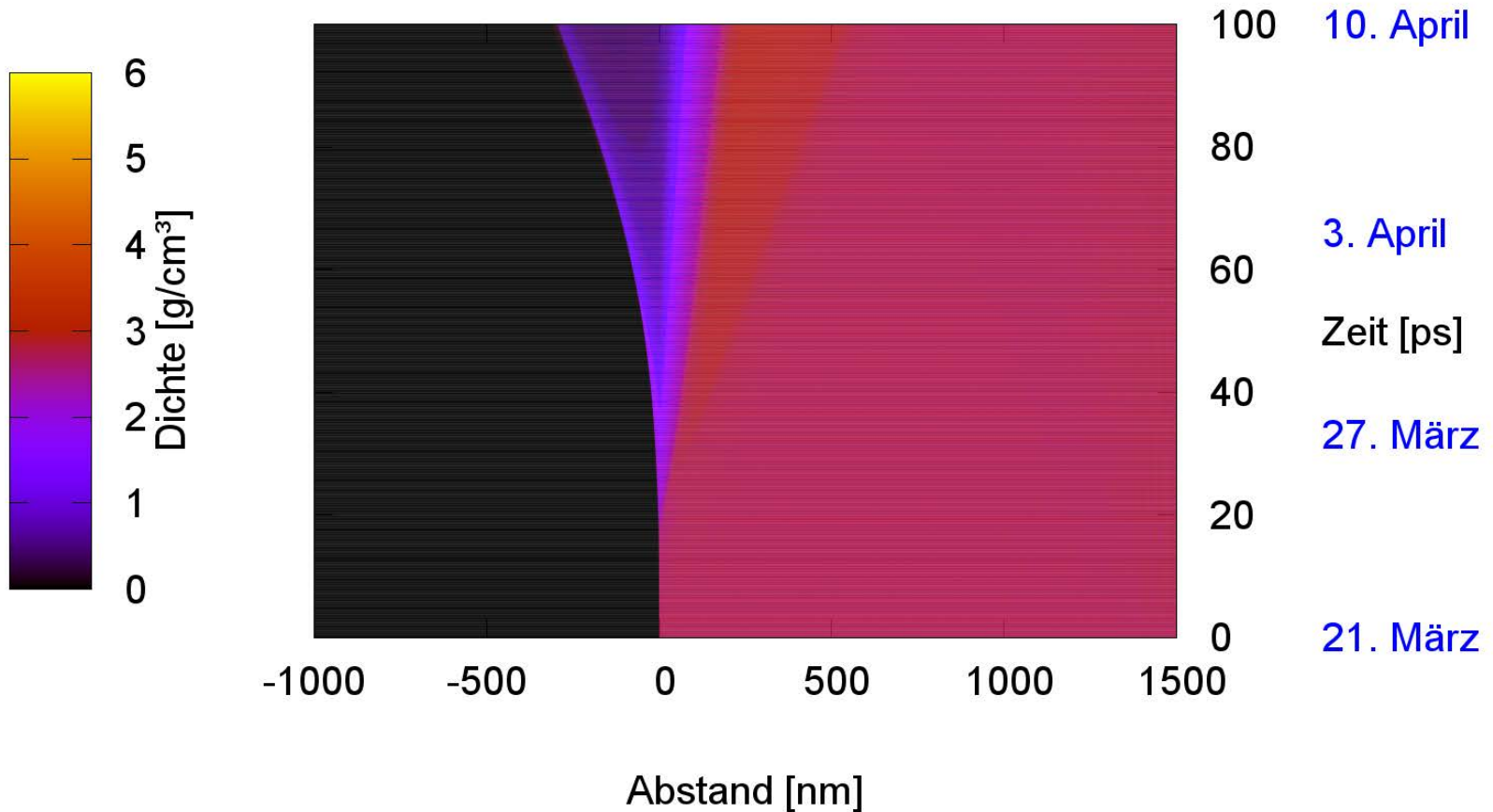
- Bisher Einfach-/Mehrfach-Pulse im fs-Bereich
 - IMD nutzbar für ps-Pulse am DLR?
 - Vorhersagen für unterschiedliche Metalle?
 - Raumfahrtrelevante Informationen aus Simulationen?
- Input:
 - Wechselwirkungen im Material
 - Laserpuls: Räumliche und zeitliche Form
- Output:
 - \vec{x}_i und \vec{v}_i aller Atome $\Rightarrow I_{sp}$ und C_m durch Skripte
 - Verteilung der Dichte, Energie, Temperatur
- ✚ Rechenzeit
- ✚ Potentiale ausschlaggebend für Qualität der Aussagen
- ✚ Implementierung von Plasma-Abschirmung durch Treibstrahl



Schub

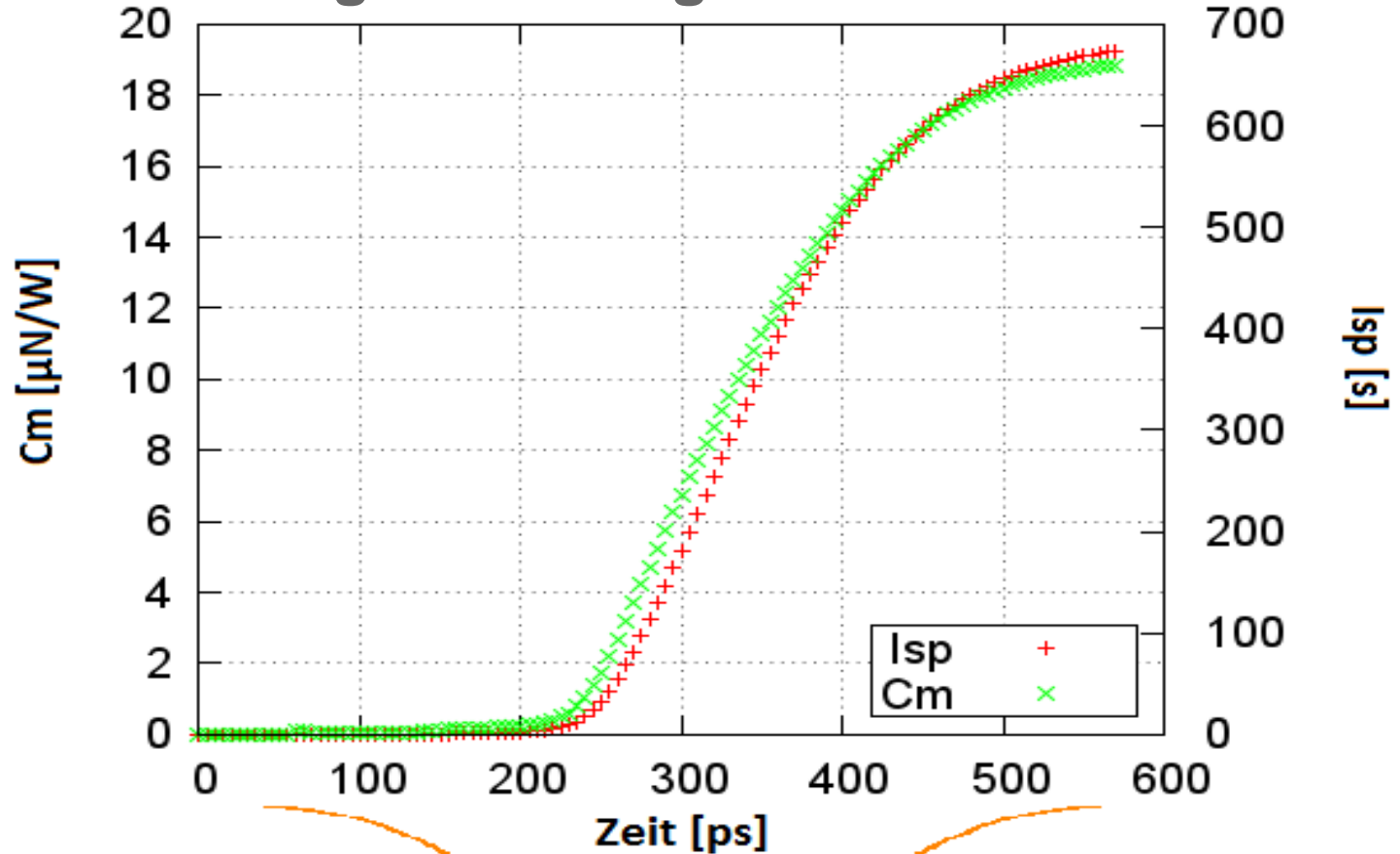
Beispielrechnung – erste Ergebnisse

- Dichteplot bei $t_{puls} = 48 \text{ ps}$, $\Phi = 1 \text{ J/cm}^2$



Schub

Beispielrechnung – erste Ergebnisse



- Parameter für MICROLAS:

$$\tau = 230 \text{ ps} , \quad \Phi = 1 \text{ J/cm}^2$$

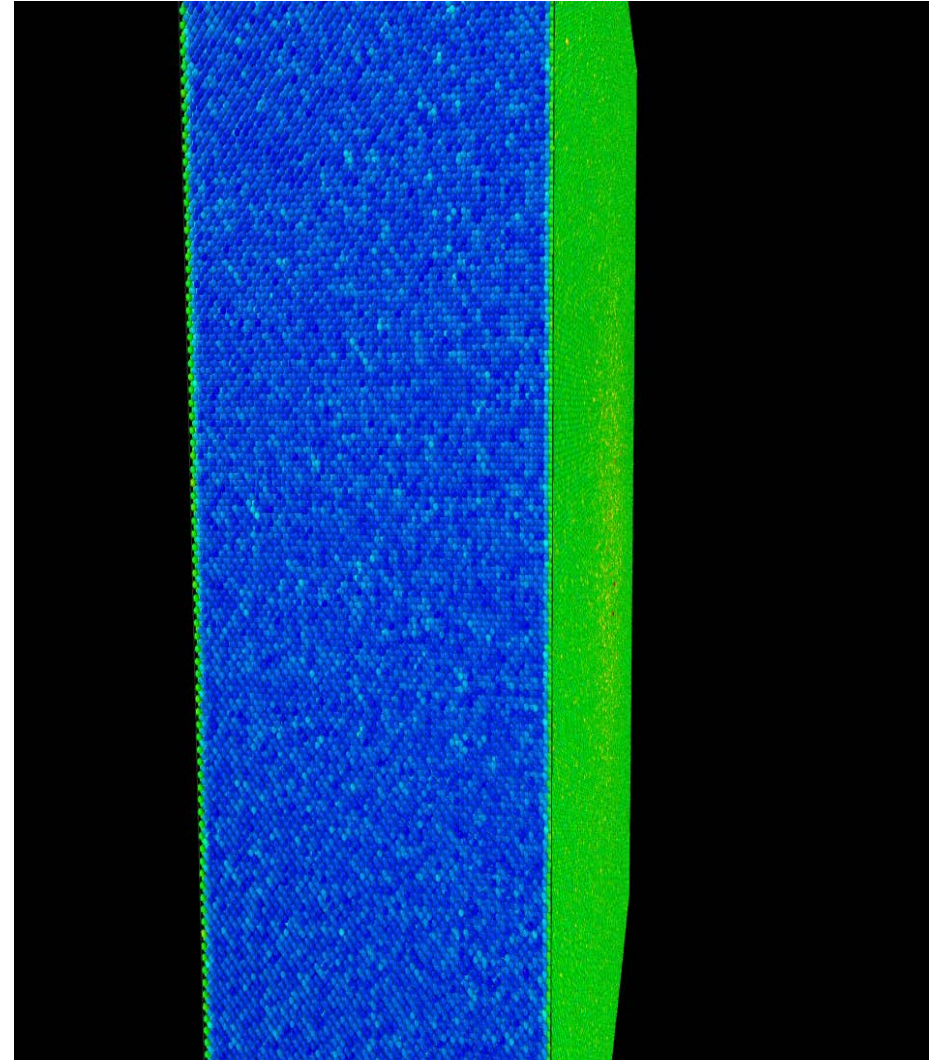


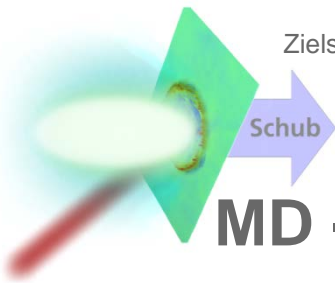


Schub

MD - Weiteres Vorgehen

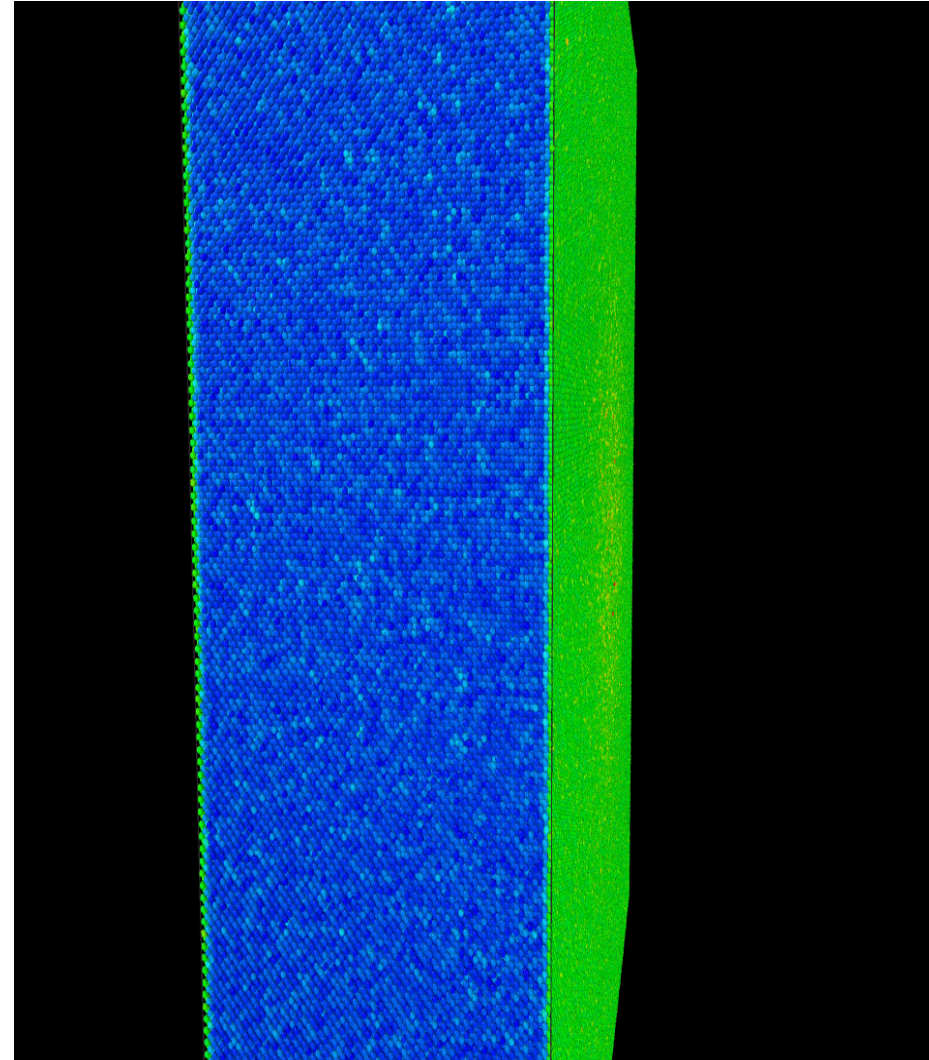
- Vergleich verschiedener Metalle (Al, Cu, Ag, Au)
- Bessere Definition der Plume für I_{sp} und C_m
- Räumlich aufgelöste Pulse im nm-Bereich oder μm -Bereich (HLRS)





MD - Weiteres Vorgehen

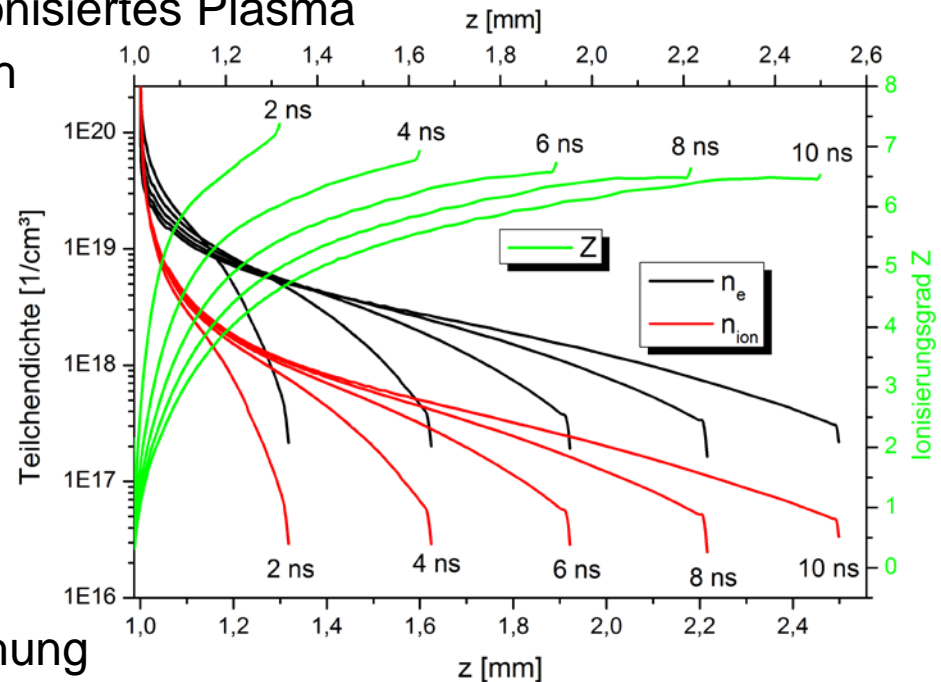
- Vergleich verschiedener Metalle
- Bessere Auswahl der Plume für Isp und Cm
- Räumlich aufgelöste Pulse im nm-Bereich oder μm -Bereich (HLRS)
- Schnittstelle für Treibstrahl - Entwicklung in PICLas



Schub

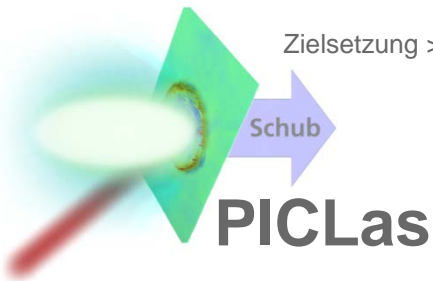
Modellierung des Treibstrahls

- Problem:
 - Kein Kontinuum
 - Extreme Gradienten, hoch ionisiertes Plasma
- Navier-Stokes nicht möglich

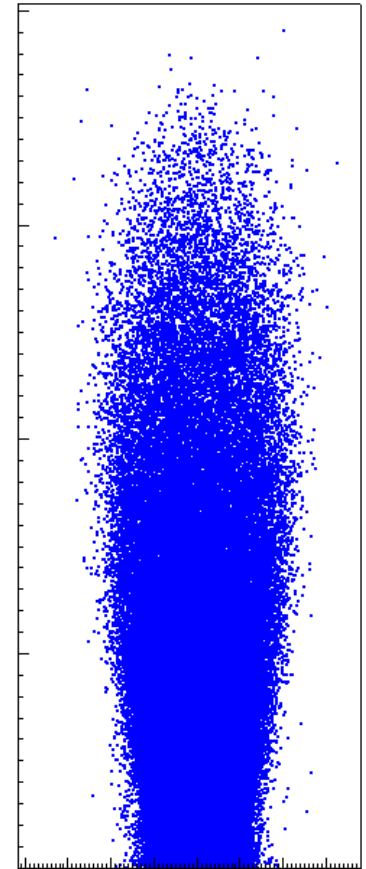


- Lösung: Partikelsimulation
 - Modell der Boltzmann-Gleichung (Geschwindigkeitsverteilung)
 - Makro-Partikel
 - Statistisches Verfahren



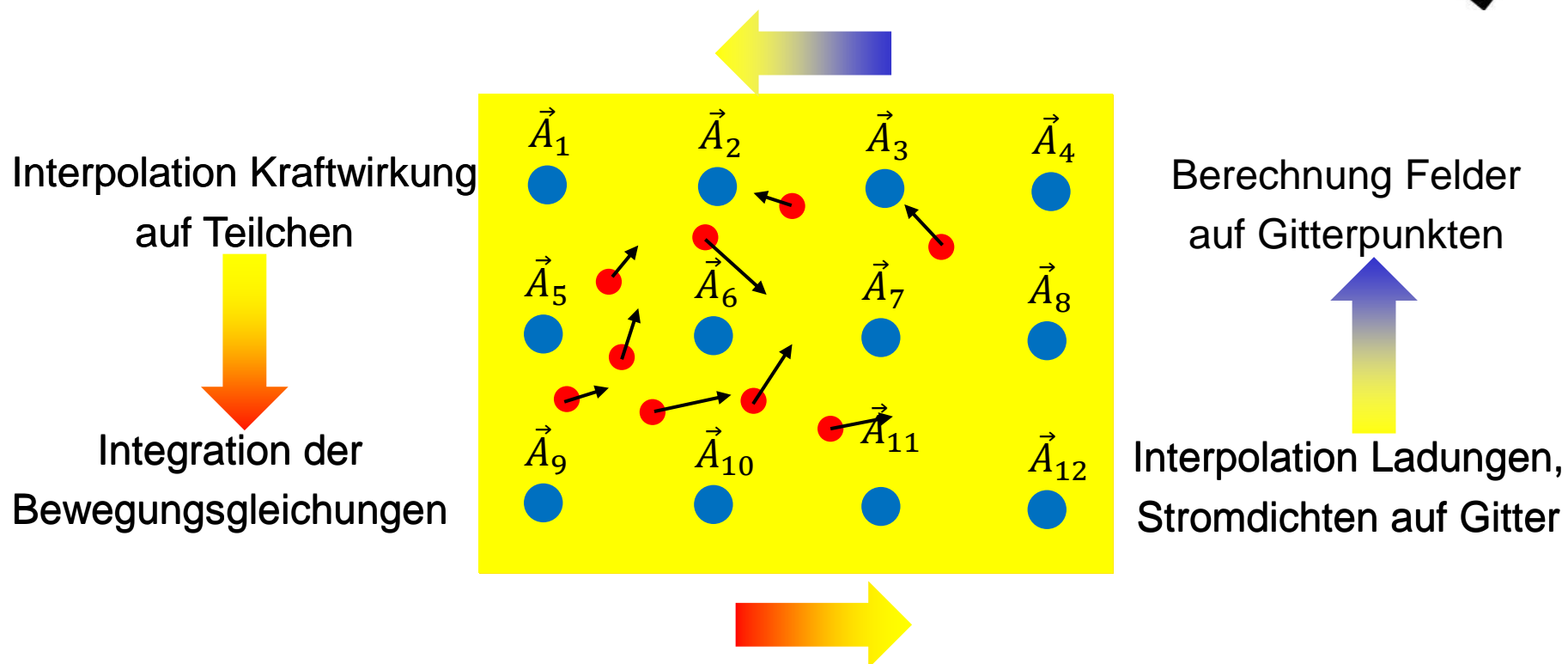


- **D**irect **S**imulation **M**onte **C**arlo: Schwerteilchen-Interaktion
 - Partikel-Stöße über Zufallszahlen
- **P**article **I**n **C**ell: E- & B-Felder durch geladene Teilchen
 - Deposition der Ladungen auf Gitter
 - Berechnen der Felder auf Gitter
 - Interpolation der Feldgrößen auf die Partikel
- Ergibt Δv der Partikel.
- Makroskopische Größen aus Mittelung





Particle-in-Cell (PIC)



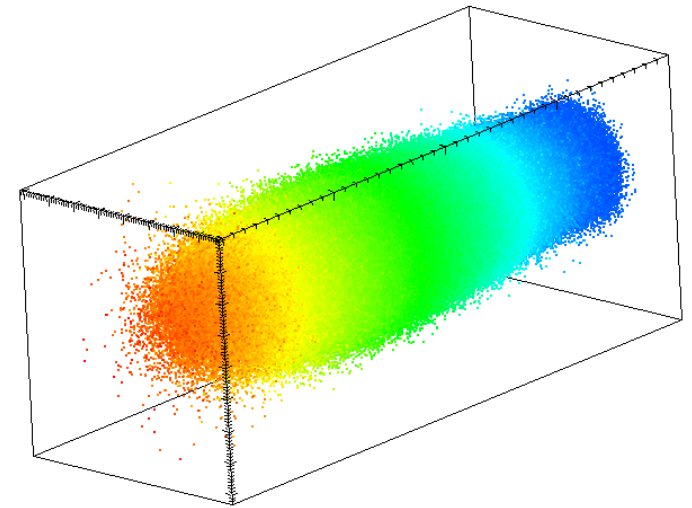
- anstelle der Teilchen auch Fluidelemente (Navier-Stokes) wählbar




Schub

PICLas – IRS & DLR

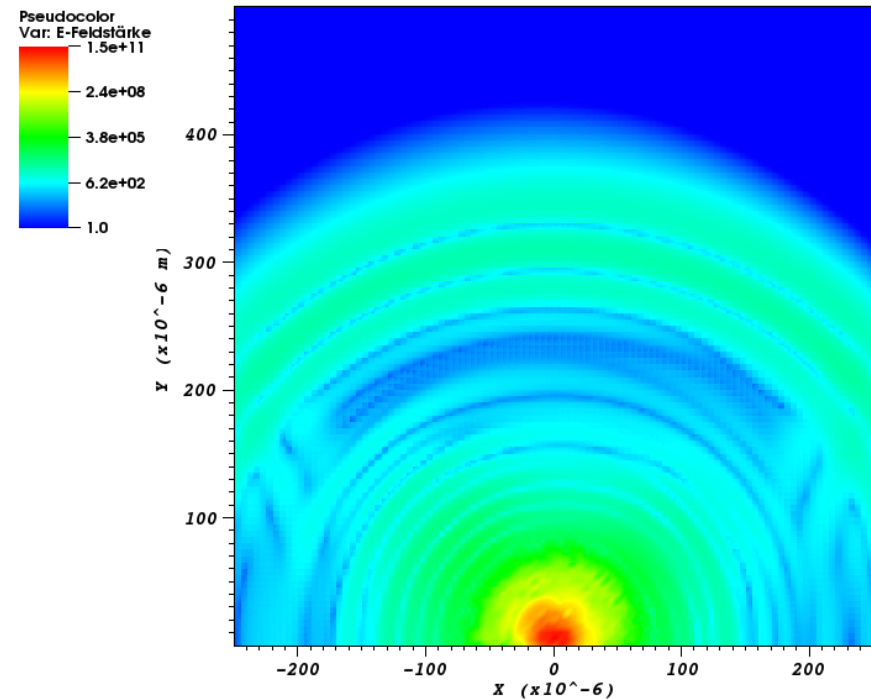
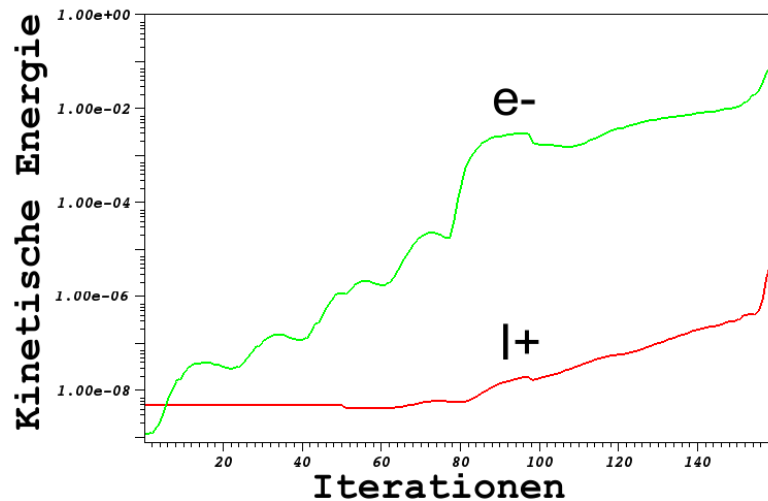
- IRS: Wiedereintritt, Ionentriebwerk, PPT, ...
- Laser-induzierte Plasmen:
 - Dichter als bisherige Simulationen
 - Mehrfach ionisiert
 - Extreme Gradienten
 - Skalenproblem: μm -Auflösung auf cm-Rechengebiet
- PICLas nicht speziell für laser-induzierte Plasmen entwickelt:
 - Keine Erfahrung
 - (Noch) keine speziellen Einströmbedingungen
 - Kein Modell für Cluster
 - Rekombination wird momentan implementiert
- Validierung!



Schub

PICLas – Ergebnisse

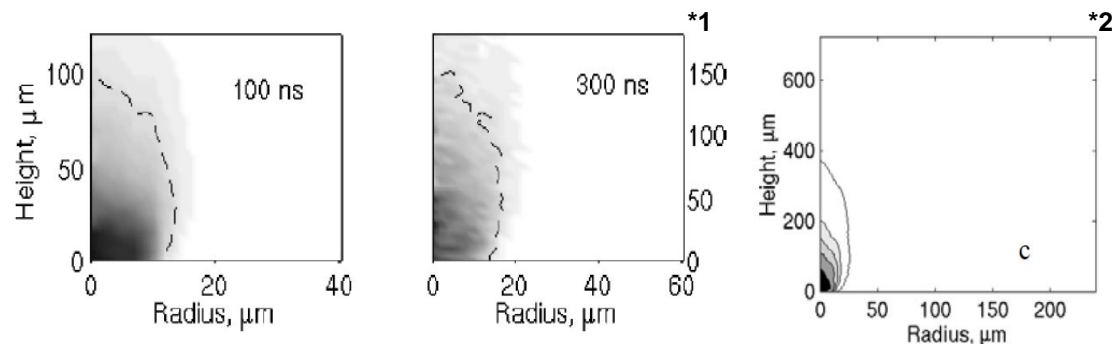
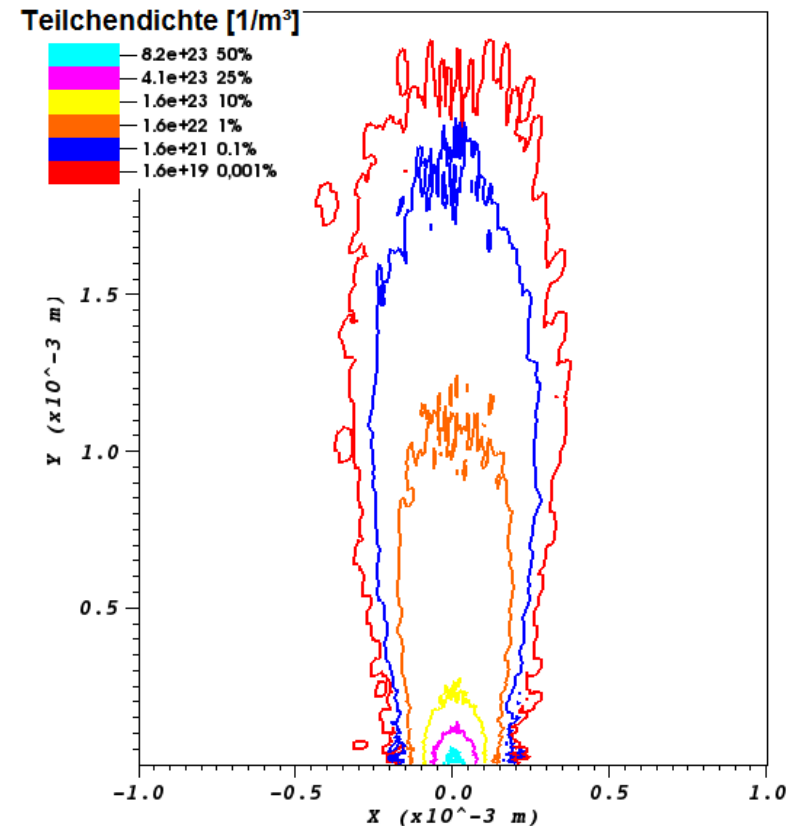
- Feldlöser wird instabil
- PIC-Teil sehr viel rechenintensiver
- Hohe Dichte problematisch



Schub

PICLas – DSMC-Ergebnisse

- Räumliche Auflösung der Eingangsdaten wichtig → spezialisiertes Modell für Einströmung nötig
- Ergebnisse zeigen gute Ähnlichkeit mit anderen DSMC-Simulationen
- Weitere Anpassungen nötig
 - Rekombination
 - Gitterwechsel





Zusammenfassung

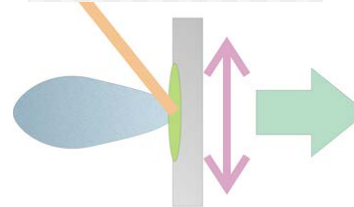
Laserpuls:

- Optica
- Raytracing (statisch)
- Analytische Modelle zu c_m und I_{sp}



Ablationsjet:

- **PICLas-Code**
- Direkte MC-Simulation mit Particle-in-Cell-Method
- Initialer Treibstrahl statt Laser-Materie-WW
- DSMC – erste Ergebnisse
- PIC – weiterer Implementierungsbedarf



Ablationsprozess (1D):

- **IMD-Code**
- Molekulardynamik
- Thermisches / TTM-Modell
- 3D-Tests / Skalierung nm \rightarrow μ m

3D-Simulation noch offen

Ablationsprozess (1D):

- **Virtual Laser Lab**
- Hydrodynamisches Modell
- 2-Temperatur-Modell (kurze Laserpulse)
- Online-Portal: <http://vll.ihed.ras.ru>

